

Fe de erratas

1. Página xiv, Nomenclatura: \vec{r}^X , \vec{r}_X y \vec{R}_{RS} deberían llevar la página y ecuación donde se definen (ecuación 1.178, página 57).
2. Página 36, Ecuación 1.87: debería ser $\frac{1}{\sqrt{NR!}}$.
3. Página 57, Ecuación 1.177: el miembro de la derecha debería tener signo +.
4. Página 147, Ecuación 2.92: falta eliminar la autointeracción, $-\delta_{ij} \frac{2}{\sqrt{\pi\eta}}$.
5. Página 147, Ecuación 2.94: falta eliminar la autointeracción, $+\delta_{ij} \frac{4}{3\sqrt{\pi\eta^3}}$.
6. Página 147, Ecuación 2.97: sobra el último término al estar ya incluido en 2.92.
7. Páginas 147-148: reescrito el párrafo tras 2.97 para explicar los términos de autointeracción. Debería ser: “El último término de la ecuación 2.92 aparece de forma natural en la deducción rigurosa del método de Ewald [87]: sirve para eliminar la autointeracción del átomo i que está incluida en la suma V_{ij}^{rec} . Este término, que sí interviene en los potenciales de las cargas puntuales, desaparece al derivar para obtener los campos y las interacciones dipolo-dipolo. Sin embargo, también hay un término análogo de corrección a b_{ij} en la ecuación 2.94, que actúa únicamente en los elementos diagonales. Esto se debe al uso de tensores cartesianos, que a orden 2 incluyen contribuciones de orden 0, pero no sucede si se emplean tensores esféricos. Por el momento, aceptaremos que las demás derivadas del potencial no tienen ningún término adicional que pueda perturbar estos resultados, posponiendo la discusión de esta cuestión hasta el capítulo 4.”
8. Página 179, Ecuación 3.77: sobra un paréntesis.
9. Páginas 273 y 274, Ecuaciones 4.185, 4.189 y 4.190, y texto tras 4.185: donde aparece $|\vec{r}_R - \vec{r}_S|$ debería aparecer $|\vec{r}_R - \vec{r}_S - \vec{R}|$.
10. Página 279, texto tras ecuación 4.220: en lugar de “en lugar de λ ” debería decir “en lugar de $\lambda/2$ ”.
11. Página 296, Ecuación 4.295: el potencial de Madelung multipolar debería ser $V_{\text{mad}}^{l_2 m_2}$.
12. Página 305, última línea: debería puntualizarse “..., que sólo es necesaria para $l = 0$ en componentes esféricas.”

13. Página 306, nota a pie de página, tercera línea: “sólo” debería llevar tilde.
14. Página 354, segundo párrafo, cuarta línea: en lugar de geoméricamente debería decir electrónicamente.
15. Página 363-364, ecuaciones 5.8, 5.10 y 5.11: la suma sobre j debe terminar en n , ya que lleva el $\frac{1}{2}$.
16. Página 382, Figura 6.4: debería decir “La figura ...”.
17. Página 426, último párrafo, segunda línea: en lugar de B2 debería decir B1.
18. Página 427, Tabla 6.12, CsF en la fase B2: R_+^1 y R_-^1 están intercambiados, R_-^2 es 2.8291, y r debería ser 1.2630.